



INSTITUTO SUPERIOR DE ENGENHARIA DE LISBOA
Área Departamental de Engenharia Química

Síntese de Complexos de Ferro (II) e Ruténio (II) com Potenciais Aplicações como Condutores Moleculares

Susana Margarida Pereira Soares

Trabalho Final de Mestrado para obtenção do grau de Mestre em Engenharia Química

Resumo:

De sua definição, um condutor molecular é “uma molécula dimensional” que permite a troca de um electrão entre as extremidades através de uma ponte, sendo elas mesmas capazes de trocar electrões com o exterior.

Os condutores moleculares envolvendo centros metálicos podem ser constituídos por um sistema orgânico deslocalizado que estabelece a ponte entre os centros metálicos terminais, sendo ambas as partes responsáveis pelo desempenho final do condutor molecular. Os espaçadores orgânicos são responsáveis pelas propriedades electrónicas e pelo comprimento do condutor, enquanto que os centros metálicos, ao introduzirem electrões no sistema, aumentam a condutividade.

No capítulo 1 faz-se uma breve introdução aos condutores moleculares, como podem ser avaliados segundo a sua estrutura. Outro assunto abordado é a influência de compostos, mostrando deste modo a interferência do tipo de espaçadores utilizados. Faz-se ainda uma breve apresentação sobre os compostos homo e heterobimetálicos. Finalmente, apresenta-se uma pequena revisão sobre os compostos organometálicos σ -metálicos.

No capítulo 2 apresenta-se a síntese e caracterização dos compostos orgânicos, nomeadamente $p\text{-NECC}_6\text{H}_4\text{CCSiMe}_3$, $p\text{-NECC}_6\text{H}_4\text{CCH}$ e $p\text{-HC}\equiv\text{CC}_6\text{H}_4\text{CCH}$.

No capítulo 3 descreve-se a síntese de diversos complexos monometálicos de Ferro (II) e ruténio (II) com os ligandos acima referidos e diferentes fragmentos metálicos $[\text{FeCp}(\text{CO})_2]^+$, $[\text{FeCp}(\text{dppe})]^+$, $[\text{RuCp}(\text{dppe})]^+$ e $[\text{RuCp}(\text{PPh}_3)_2]^+$.

Os complexos obtidos foram caracterizados utilizando as técnicas espectroscópicas usuais: RMN, IV, UV-vis. A eficiência da interacção electrónica entre os centros, ao longo do sistema π , foi avaliada por estudos electroquímicos (voltametria cíclica).

No capítulo 4 encontram-se descritas as diversas tentativas de síntese dos compostos homo e heterobimetálicos. Os ligandos e fragmentos utilizados foram os mesmos que no capítulo anterior.

O capítulo 5 descreve os pormenores experimentais da síntese e a caracterização espectroscópica dos compostos apresentados nos capítulos anteriores, bem como as condições gerais em que foram obtidos.

Palavras-Chave – Condutores moleculares, Ferro (II), Ruténio (II), Síntese, Caracterização, η^5 -monociclopentadienilo.

Dezembro de 2008